

- 50年以上前、朝永、Feynman、Schwingerらは電子の磁気能率のわずか0.1%程度のずれを理論計算することによって、繰り込み理論と量子電磁気学を確立した。その結果はトランジスタ/LSIをはじめ現代社会で使われている科学技術の基礎となっている。
- 筑波大 CP-PACS計画をはじめとする過去数十年にわたる研究の進展により、計算基礎科学分野、特に格子QCDの分野は、実験と直接比較出来る定量的な理論計算を行えるようになり、さらには物理予言を行う位置にたどり着いた。これは(結果に影響を与える quoteされない)一切の系統誤差が許されないという事を意味する (c.f. 藏増さんの講演)。
- このような妥協が許されない計算で国際的な競争力を保つためには、計算資源の大きさはもちろん、しっかりしたソフトウェアの開発・保守・管理体制に加え、質・量共に豊かな人的資源が必要不可欠である。例えば、日本-米国-英国 3国にまたがるある格子QCDの共同研究体のメンバーは数え方によっては今や50人を超えようかという勢いである。
- いかにして、このような貴重な人的資源を育成し継続的に保持していくかについてのヒントにするため、身近に観察する機会があった次の2+1つの組織について報告する:
  - 米国エネルギー省 科学局  
SciDAC (Scientific Discovery through Advanced Computing)計画
  - 金沢大学 理学部 計算科学科
  - (金沢電子出版株式会社)

# 取材源

- US SciDAC <http://www.scidac.gov/>
- US Lattice Quantum Chromodynamics <http://www.usqcd.org/>
- 金沢電子出版株式会社 <http://www.kep.bz/>
- インタビュー
  - Richard Brower (ボストン大 教授) SciDAC USQCD 計画 ソフトウェア委員長
  - Norman Christ (コロンビア大 教授) QCDOC プロジェクト PI
  - Andreas Kronfeld (フェルミ国立研究所) USQCD 科学委員長
  
  - 小田 竜樹 准教授、長尾 秀実 教授、小林 玉青 助教 (金沢大学 計算科学科)
  - 鈴木恒雄 教授 (金沢大学 総合メディア基盤センター長 金沢電子出版(株) 専務取締役)



# SciDAC

Scientific Discovery through Advanced Computing

- 2001年より 5ヶ年計画, 2006年より SciDAC-2 (数値風洞、CP-PACS etc. に対抗)
- エネルギー省 科学局から与えられた  
「新しいハードに対応できるソフトウェアの開発体制を作れ」という命題に対応
- **ハードウェアは別** 国研/州での調達 や ASCR (高度科学計算研究 DOE)プログラム  
(但し ソフトに密着した ハードのR&Dは含む)
- **参加機関** 56大学, 17研究所, 3民間企業
- **年間総予算**
  - \$70 M (FY07 環境安全部、NSF参加分を含む)
  - \$80 M (FY08 核安全局、NSF含む)
- **科学プログラム** 35 (→50) 課題 \$ 0.5~5 M/課題/年 応募総数250課題
- **選定プロセス**
  - 応募書類 (論文形式 USQCD 20+8 pages)
  - 半日のヒアリング @ ワシントンDC
  - 分野内外のパネル (素核宇宙、物性、物質、エネルギー、高分子 ...)
  - 競争を排除しグループ間の連携や計算機科学者の参加を推進
  - 物理(6) 気象(4) 環境(2) 核融合(8) ライフ(3) ナノ(10) (web公開分のみ)

# SciDAC (科学プログラム以外)

- **Institute (COE)** 4+13 大学 \$ 8 M/年 幅広い教育と研究 スクール、講習会、コード キャンプ
    - **ペタに移行出来る分野を広げる**ための SciDAC-2からの方策  
c.f 大学院GP「**大学連合による計算科学の最先端人材育成**」  
(神戸、九州、金沢、愛媛大)
  - **共同利用** 3課題 データ共有、グリッド
  - **Center for Enabling Technologies** 技術開発 7課題 \$20M/年
    - 可視化、分散、解析技術、応用数学、アルゴリズム、コンパイラなどの  
計算機科学
  - **議会(納税者)に対する説明責任**
    - 4半期毎の報告書 + 学識経験者のディレクタ、プログラムマネージャがいて、  
提案内容や進捗などをチェック、議論が行われている (形式的な審査に終わらない工夫)
    - 季刊の広報誌 (**流麗カラー** 70ページ) や スクールなどのアウトリーチ
    - Conference を 年一回開催 (SciDac 2008) 1週間 100講演
- 「**計算科学の新時代を拓く**」「**新しい学会(発表の場)を創設**」



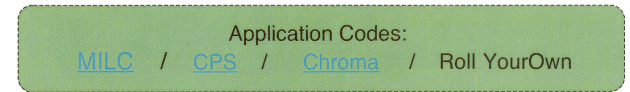
- 格子色力学(QCD) と その周辺分野
  - ソフト開発・保守 USLQCD Infra. Porject (SciDAC)
  - ハード開発 QCDOC(BG/L のプロトタイプ), クラスタ
  - サイエンス
  - 各研究機関がもつCPU時間の共用分の配分  
 BNL QCDOC (10TFLOPS)、FNAL, Jlab PCクラスタ(~3K nodes) ,  
 ANL BG/P ( 7/111 TFLOPS), ORNL Cray XT4(25/250 TFLOPS)  
 計 約 50TFLOPS ) (他にグループ毎に非共用資源あり)
- 組織 Senior Personnel 85+人 (物理 と計算科学)
  - エグゼクティブ委員会 9人 全体方針、意思決定、PostDoc/Fellow 配分
  - 科学プログラム委員会 8人
    - 計算資源を公募し、年一回2日間の審査会を開き配分を決定
    - Plan A (グランドチャレンジ)と Plan B(萌芽) うまくいくと BからAへ昇格  
Plan B は Plan A の時間を削って確保
    - 審査側も業界人なので実質的な議論が活発 粒度の問題
  - ソフトウェア委員会 7人 → [SciDAC USLQCD Infrastructure Project](#)
  - 監督／総括委員会 7人

# USLQCD Infrastructure Project

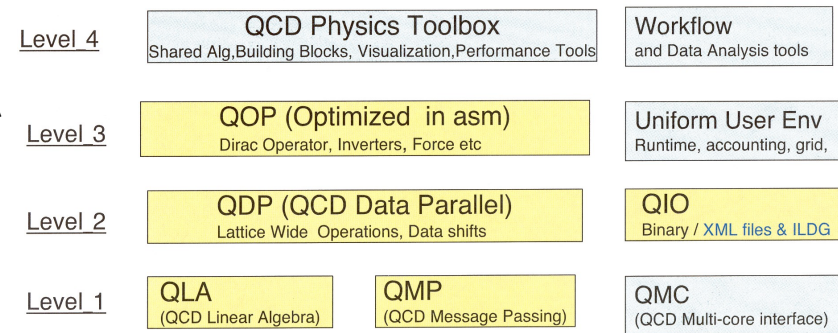
- SciDAC の科学プログラムの一つ 3研究所 + 11大学が参加
- 予算 約 \$ 2.5 M x 5年 ( ~ 18 Full-Time Equivalents )  
ほぼ全額 ソフトウェアの PostDOC/Fellow の人件費
- 二つの重点
  - プログラムライブラリの開発・保守
    - 各ハードで性能が出せるためのHPCコード
    - 普遍的な物理のための上位プログラム OOP
  - ハードの研究開発 (シミュレータ、プロトタイプ機)
- ソフト保守専用のサポートスタッフを雇用  
(誰かがバスにひかれてもプロジェクトが瓦解しない体制)
  - 期限付き (5ヶ年計画 or ハードの費用と同期)
  - アカデミック出身 ( 科学 と 計算科学 両方を知っている)
  - 各研究機関に所属 (科学者との有機的な連携を取る)
  - 週に一回、電話会議 (今やっていることを自由に話す 情報交換)
- ドキュメンテーション、マニュアルの整備
- 進捗をwebで公開 [physics.bu.edu/~brower](http://physics.bu.edu/~brower)



# USQCD の ソフトウェア



## SciDAC-2 QCD API



- 上位部分は **オブジェクト指向 ライブラリセット**  
CPS, Chroma, (MILC) 10-20万行
  - 車輪の再発明を廃す
  - 一行の変更でクォークの種類を変更可
  - 整理整頓しやすい 一々欲しいコードを探さなくて良い
- QCDOC (BG/L のプロトタイプ)の製作グループ  
**計算機科学との共同作業** (共著論文、引用)  
素粒子の大学院生が CS の講義に出席  
**ベンダーの密接な協力** (卒業生)  
(c.f. CP-PACS, PACS-CS, etc.)
- O/S, I/O, 通信, HPC 部分(線形代数、SU(3)ゲージ行列、ディラック(疎)行列の掛け算) は **プロセッサ毎にチューンしたアセンブラ**  
(機械生成 BAGLE [www.ph.ed.ac.uk/~paboyle/bagel/Bagel.html](http://www.ph.ed.ac.uk/~paboyle/bagel/Bagel.html)  
日本IBM製のハンドアセンブラの方が速かった)
- 再利用性と高効率を両立 → 高い生産性
  - 問題の安定性 (ターゲットとなるハミルトニアンは物理法則、対称性で一意に決まる)
  - 多彩なアプリケーション (多くの物理量)
  - ソフトウェアに投資する対価は十分

# 開発とキャリアパス

- Fortran/ C から C++ に変えた一番の理由

「計算機企業 や Wall Street に就職する大学院生に有利だから」

- 開発 と メンテナンス体制 (主にソフトウェア)

SciDACの PostDoc (3年) Fellow (5年) USQCD \$14M = 16人 × 5年

USQCDでは主にアプリケーション側の卒業生 / PostDoc が採用されている  
未だ 2期目なので Career Path のサンプル数は少ない

- 5年 Fellow 3人 ... ライブラリの保守・管理、job のお守り、first runの 試行錯誤  
→ (almost) パーマネント @ BNL, Jlab 手放せない人的資源に

「例えパーマネントじゃなくても 一番速い機械の側にいられる方が魅力的」

- 3年 PostDoc 3人 ... SciDAC level-2 middle ware の開発、QCD真空公開 +物理  
→ 次の物理PostDOC @ NBI, FNAL  
→ Computer Scientist @ ANL

「物理での業績に加えて Software skill を身につけられる」



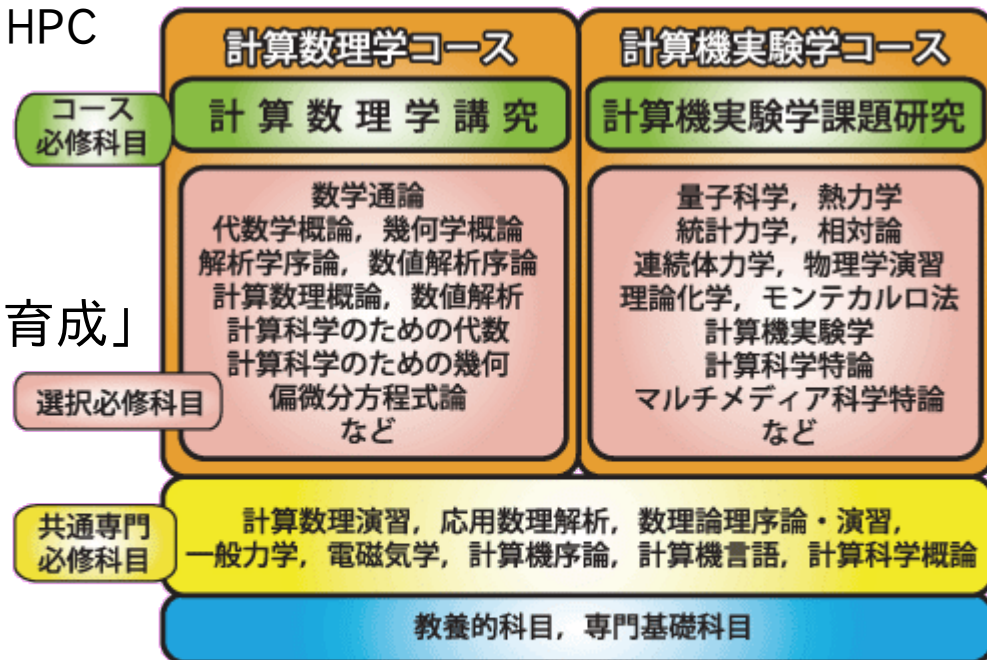
# 金沢大学 理学部 計算科学科

- 国内唯一の計算科学の学科 (学部から大学院まで)
- 平成8年設立 数学、物理、化学の各学科
- 卒業生:約240名、大学院進学約100名
- 計算数理学講座 8人 (P 4人、AP 2人、L/A 各1人)  
基礎数理と計算機支援による数理現象の解明  
離散数学、数値解析、非線形数学、力学系、数理物理
- 計算機実験学講座 9人 (P 3人、AP 5人、A 1人)  
自然現象、複雑系の解明、計算機実験自体の研究  
物性物理、理論化学、計算力学、流体力学 HPC

## 大学院教育改革支援プログラム

「大学連合による計算科学の最先端人材育成」

平成19年度～平成21年度  
(神戸大学・九州大学・愛媛大学・金沢大学)



## •大学院GP「大学連合による計算科学の最先端人材育成」

(神戸大学・九州大学・愛媛大学・金沢大学)

- 教育用スーパーコンピュータ と E-learning の利用による新しい授業体系
- KISS (神戸シミュレーションスクール)
  - 講義と実習の2本建て
  - H19 1回、H20 4回 参加者: 30-50名
- 新しいカリキュラム と 教材作成
  - 計算科学の共通項を串刺し抽出 (MD, 第一原理計算, MPI etc.)
  - 各テーマ 15回分 E-learning + ビデオ と 実習 (単位互換)

## •金沢電子出版株式会社 2005年～、社員 20 名

- 各教育機関に共通する基礎教育を中心にした  
カスタマイズ可能なE-learning のコンテンツ制作／制作支援
- 博士／PostDOC を積極雇用 (現場を知っている、Skillもある)
- 今期 はじめて黒転 今月 増資新株を公募中  
資本金 1500万円→2,500万円

# 計算科学科 課題 と 将来構想

- 歴史が短い
  - 計算機が出来て 50年程度 (c.f. 物理 300年、数学 2,000年以上)
  - 定番カリキュラム や 教科書 が少ない
    - 長い時間をかけて 育んでいくことが必要
- 「計算科学会」がない
  - 各スタッフがどうしても別々の科学側の母体(物理、数学、化学)に向きがちに (c.f. US SciDAC は 計算科学会 (発表の場) を作った)
- ハード特性を意識出来るようになるリテラシー教育
  - 問題毎にどのアーキテクチャが最適か
  - アプリケーション毎に クリティカルな点分かる  
計算量 / メモリ / バス / 通信 / I/O
- 例えば「企業のプロダクトまでを見据えた教育」
  - 学生、院生、ポスドク、教員までも企業に派遣
  - 計算結果がどう最終プロダクトに反映されるかまでを見届けられるようなカリキュラム
  - 企業で使われているソフトや計算手法の習得

# 『スーパーコンピューティング研究教育の拠点の形成』 へ向けて、計算科学の人材育成と雇用創出 諸分野の学生・ポスドクの多様なキャリアパス

育成が急がれる人材

- 計算科学と計算機科学の双方に知識のある人材  
(ハード開発者と計算科学研究者の間に入ることの出来る人材)
- プログラムの実装、メンテナンス、チューニングを専門にする人材  
(計算科学の素養を持った、ソフトウェア開発に責任を持つ人材)

教育・人材育成の現場で要求されること

- 計算科学の枠組みで、学部・大学院教育の早い段階で上記人材育成に取り組む
- 幅広い諸分野の学部・大学院教育で計算科学要素を取り入れる
- 各分野の教員・研究者に対する再教育

金沢大学ペタスケールコンピューティング教育研究グループ  
(斎藤峯雄, 石井史之 et. al.)

特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針に対する意見書 より  
(2008-03-28)

# 金沢大学ペタスケールコンピューティング教育研究グループ

(斎藤峯雄, 石井史之 et. al.)

## 特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針に対する意見書 (2008-03-28)

- 計算科学・計算機科学の知識を併せ持った高度な人材育成、様々な分野に潜在的に存在する計算科学手法による研究をおこないたい学生・研究者に対する高度な支援をオールジャパンで効率的におこなう必要がある。
- 日本全国に広くネットワークを拡げ、地方・中央を問わずに人材を育成・発掘する体制・拠点作りが重要となる。
- 継続的にスパコンの成果を幅広く社会に還元していくためには、大学教育・大学院教育により、計算科学的素養を身につけた人材を、多岐にわたる産業分野へ排出していく必要がある。
- 計算科学は自然科学・工学の幅広い分野の問題解決に適用可能であり、次世代以降のスパコンを有効利用するためには、各専門分野のバックグラウンドを持った人材を再教育していく必要がある。
- その点において、次世代スパコンでは、多様な教育プログラムを整備し、諸分野に属する大学院生、ポスドクにとっての新たなキャリアパスを創出するべきである。

# 教育拠点体制

理化学研究所  
理研BNL 研究センター 出淵卓 (金沢大兼任フェロー)  
「次世代スーパーコンピュータ」

高エネルギー研究所  
橋本省二准教授

兵庫県立大学

神戸大学

九州大学・愛媛大学

大学院教育支援  
プログラム

スパコン  
運営協力

筑波大学  
「計算科学センター」  
数理解析科学研究所 青木慎也教授  
計算科学センター 館野賢准教授

金沢大学

「教育用スーパーコンピュータ」  
長尾秀実・斎藤峯雄 他多数

メディア基盤センター  
鈴木恒夫

福井大学  
工学研究科 橋本貴明准教授  
田中ダン講師

富山大学  
総合情報基盤センター 布村紀男准教授

金沢工業大学  
工学部情報フロンティア系 山岸芳夫講師

金城大学  
社会福祉学部 川辺弘之准教授  
木村剛研究院

金城短期大学  
ビジネス実務学科 矢澤建明准教授

北陸地区大学間連携スパコン活用による教育ネットワーク



# プロフィール

## 出渕 卓(いずぶち たく)



### 【現職】

金沢大学 理工研究域 素粒子論研究室 助教

↓ (10月1日より)

米国 ブルックヘブン国立研究所 テニュアトラック サイエнтиスト

### 【略歴】

1997年 東京大学理学系研究科博士課程修了

1997年～ 筑波大学 ポスドク **CP-PACS (0.6 TFLOPS)**

1999年～ 金沢大学 就職

2001年～ 米国ブルックヘブン国立研究所 ポスドク  
**QCDSP (0.6 + 0.4 TFLOPS)**

2003年～ 理研BNL研究センター 兼務フェロー  
**QCDOC (20 TFLOPS)**

2008年～ ブルックヘブン国立研究所 テニュアトラック